



TITLE:

三角格子反強磁性体の逐次相転移
と緩和過程(VI新しい視点,相転移に
おける秩序形成過程の動力学,科研
費研究会報告)

AUTHOR(S):

上江洌, 達也; 川崎, 和子

CITATION:

上江洌, 達也 ...[et al]. 三角格子反強磁性体の逐次相転移と緩和過程(VI新しい視点,相転移
における秩序形成過程の動力学,科研費研究会報告). 物性研究 1986, 46(4): 114-117

ISSUE DATE:

1986-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92087>

RIGHT:

三角格子反強磁性体の逐次相転移と緩和過程

奈良女子大学 理学部 上江洲達也 川崎和子

[I] はじめに

最隣接スピン間には反強磁性的な相互作用 $J_1 < 0$ があり、 $\sigma =$ 隣接スピン間には強磁性的な相互作用 $J_2 > 0$ を持つ二次元三角格子磁性体は、1977年、Mekata⁽¹⁾ の分子場理論によりその性質が明らかにされてから、フラストレーションを持つ系の問題として多くの研究者の注目するものとなった。この系の特徴は、磁気構造の対称性から来る縮退にある。その為、上記の互いに拮抗する二種類の相互作用の大きさの割合により、温度の変化に伴っていわゆる逐次相転移が生じ、ある特定の物理的条件下では、部分的に無秩序な相が現われる。

ここでは、簡単に為、Ising spin からなる二次元三角格子系を考え、Ising Kinetics の方法を用いて、相転移と緩和過程について fluctuation の効果と取り入れて議論したい。

[2] 運動方程式

いま Hamiltonian が次式で与えられる二次元三角格子 Ising スピン系について考える。

$$\begin{aligned} H &= -2 \sum_{\langle j,k \rangle} J_{jk} S_j^z S_k^z \\ &= -2 S^2 J_1 \sum_{j,k} \delta_j \delta_k - 2 S^2 J_2 \sum_{j,k} \delta_j \delta_k \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \text{但し } S_j^z &\equiv S \delta_j \quad \delta_j = \pm 1 \\ J_1 &< 0, \quad J_2 > 0 \end{aligned}$$

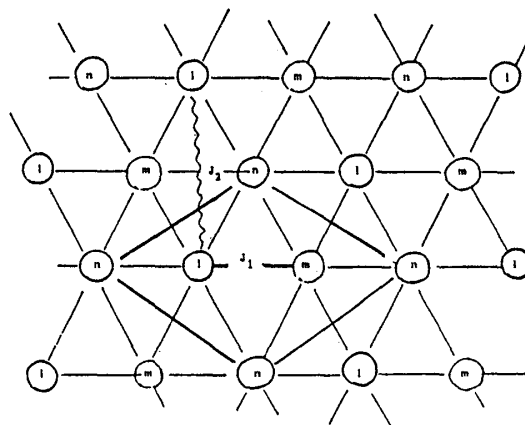
(1)式において σ -項は最隣接スピン間の pair について、 $\sigma =$ 項は $\sigma =$ 隣接スピン間の pair について 和をとるものである。

図(1)

この系は、基底状態のスピン配置から図(1)に示すように、三つの副格子 l, m, n に分割されることからわかる。

系の緩和過程を調べる為、Ising Kinetics⁽²⁾ の方法を適用する。系全体 N 個のスピン配置を時刻 t で

$(\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_N) \equiv \{\delta\}$ にあるときの確率関数を $P(\{\delta\}; t)$ とすれば l -副格子にあるスピン $\delta_j^{(l)}$ の期待値は



$$\langle s_j^{(1)} \rangle = \sum_{\{s\}} s_j^{(1)} P(\{s\}; t) \quad (2)$$

であり, j -spin の遷移確率 $\omega = \frac{\tau}{2} [1 - s_j \tanh(-\beta E_j)]$ (但し $\beta = 1/kT$) とすれば, その運動方程式は

$$\frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} \langle s_j^{(1)} \rangle = -\langle s_j^{(1)} \rangle + \langle \tanh(-\beta E_j^{(1)}) \rangle \quad (3)$$

となる。但し $E_j^{(1)}$ は $s_j^{(1)}$ の受ける局所場で

$$E_j^{(1)} = -2J_1 \sum_{i=1}^6 s_i + J_2 \sum_{i=7}^{12} s_i \quad (4)$$

と書かれる。(4)式の第一項は $s_j^{(1)}$ の最隣接にある6個のスピン ($i=1, 2, \dots, 6$) すなわち3個の m -副格子にあるスピンと n -副格子にあるスピンに対する和であり, 第二項は, σ -隣接格子すなわち同じ l -副格子にある6個のスピン ($i=7, 8, \dots, 12$) に対する和である。 $s_j^2 = 1$ なる関係を用いると $\tanh(-\beta E_j^{(1)})$ は次式のように s_i の多項式で表わされる。

$$\tanh(-\beta E_j^{(1)}) = \sum_{M=0}^6 \sum_{L=0}^6 G_{ML} \sum_{i_1 \in (1, \dots, 6)}^{6_M} s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_M} \sum_{i_1 \in (7, \dots, 12)}^{6_L} s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_L} \quad (5)$$

但し, G_{ML} は温度 kT 相互作用の大きさ J_1, J_2 に依存する量である。(5)を(3)に代入すると $\langle s_j^{(1)} \rangle$ に対する運動方程式はスピンに関して高次の相関数を含む hierarchy 構造を持つ連立微分方程式となり, 一般に解くことは出来ない。そこで, 我々は, 同じ副格子にある磁化 $\langle s_j^{(1)} \rangle$ は同一の値 $\langle s^{(1)} \rangle$ を持つものとし, 高次の相関数 x を体のキエムラントで展開して (=体近似) Table (1) に示した9個の未知数 x_1, x_2, \dots, x_9

に関する連立非線型微分方程式を導き, 解を数値的に求めることにする。

Table (1)

| | | | | | |
|-------|---------------------------|-------|-----------------------------------|-------|-----------------------------------|
| x_1 | $\langle s^{(1)} \rangle$ | x_4 | $\langle s^{(1)} s^{(m)} \rangle$ | x_7 | $\langle s^{(1)} s^{(1)} \rangle$ |
| x_2 | $\langle s^{(m)} \rangle$ | x_5 | $\langle s^{(m)} s^{(m)} \rangle$ | x_8 | $\langle s^{(m)} s^{(1)} \rangle$ |
| x_3 | $\langle s^{(n)} \rangle$ | x_6 | $\langle s^{(1)} s^{(n)} \rangle$ | x_9 | $\langle s^{(n)} s^{(m)} \rangle$ |

$$\frac{d}{dt} x_i = -\tau x_i - f^{(i)}(x_1, x_2, \dots, x_9) \quad (6)$$

但し $i=1, 2, 3$

$$\frac{d}{dt} x_i = -2\tau x_i - g^{(i)}(x_1, x_2, \dots, x_9) - h^{(i)}(x_1, x_2, \dots, x_9) \quad (7)$$

但し $i=4, 5, \dots, 9$

[3] 定常解と安定性

変数 x_1, x_2, \dots, x_9 を成分とするベクトル $\vec{X}(x_1, x_2, \dots, x_9)$ を考えた時, この系の定常解 \vec{X}_s は

$$\frac{d}{dt} \vec{X}_s = 0 \quad (8)$$

によって与えられる。平衡状態を表わす解と見出すには, (8)式の解の安定性と

調べるなければならない。

いま、定常状態からの微小なゆらぎ $\vec{\delta X}$ を導入し、その時間発展を調べることにより、解の安定性を調べる。

$$\vec{X} = \vec{X}_s + \vec{\delta X} \quad (9)$$

とすると、方程式 (6) ~ (9) から $\vec{\delta X}$ に関する次の運動方程式が得られる。

$$\frac{d}{dt} \vec{\delta X} = A(\vec{X}_s) \vec{\delta X} \quad (10)$$

行列 A の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_9$ 、それに対応する固有ベクトル $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_9$ により ゆらぎ $\vec{\delta X}(t)$ は、

$$\vec{\delta X}(t) = \sum_{i=1}^9 f_i e^{\lambda_i t} \vec{e}_i$$

で表わされる。従って全ての固有値の実部が負である解 \vec{X}_s が安定な解とみなすことが出来る。

Table (2) に $\alpha = -0.2$ の場合について定常解 \vec{X}_s の成分 x_1, x_2, x_3 すなわち 三つの副格子の磁化の値と 行列 A の固有値の最大値を示す。但し $\alpha \equiv 2J_2/J_1$ 。

極低温では 2つの副格子の磁化が等しく残り、一つの副格子の磁化が、それと反対符号を持つ 2F 状態 にあり、温度の上昇に伴い $T=T_1$ で部分的無秩序相に相転移することから明らかにされている。更に温度を上げると $T=T_N$ において全ての磁化が零である 常磁性相への相転移がみられる。このようにして、温度の変化に伴う逐次相転移の様子が示されている。

Table (2)

| \tilde{T} | Phase | 3 Sublattice Magnetizations | | | λ_{max} |
|-------------|-------|-----------------------------|--------|--------|-----------------|
| 0.05 | Para | 0 | 0 | 0 | 0.4119 |
| | 2F | 0.997 | 0.997 | -1.0 | -0.0802 |
| | P.d.o | -0.999 | 0 | 0.999 | 0.3407 |
| 0.1 | Para | 0 | 0 | 0 | 0.3227 |
| | 2F | -0.998 | 0.997 | 0.997 | -0.1986 |
| | P.d.o | 0 | -0.985 | 0.985 | 0.1377 |
| 0.2 | Para | 0 | 0 | 0 | 0.2056 |
| | 2F | 0.613 | 0.613 | -0.963 | -0.0078 |
| | P.d.o | 0 | 0.937 | -0.937 | 0.0059 |
| 0.3 | Para | 0 | 0 | 0 | 0.0054 |
| | 2F | -0.524 | 0.912 | -0.524 | 0.0020 |
| | P.d.o | 0.849 | 0 | -0.849 | -0.0021 |
| 0.4 | Para | 0 | 0 | 0 | 0.0701 |
| | 2F | 0.424 | -0.787 | 0.424 | 0.0025 |
| | P.d.o | 0 | -0.710 | 0.710 | -0.0026 |
| 0.45 | Para | 0 | 0 | 0 | 0.0501 |
| | 2F | -0.349 | -0.349 | 0.667 | 0.0015 |
| | P.d.o | 0 | 0.592 | -0.592 | -0.0016 |
| 0.5 | Para | 0 | 0 | 0 | 0.0212 |
| | 2F | -0.235 | -0.235 | 0.461 | 0.0004 |
| | P.d.o | 0 | -0.403 | 0.403 | -0.0004 |
| 0.55 | Para | 0 | 0 | 0 | -0.0077 |
| 0.6 | Para | 0 | 0 | 0 | -0.0363 |

[4] 緩和過程

前の章では 平衡状態について調べて来

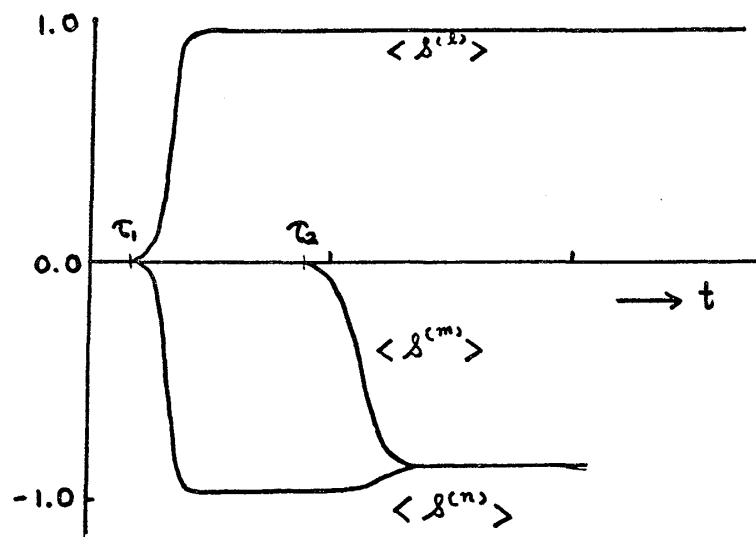
たが、ここでは、その状態に到る緩和過程について述べる。いま初期条件として全ての変数 x_1, x_2, \dots, x_9 が 1 であるとして 方程式 (6), (7) を解く。

この初期条件の物理的意味は $t < 0$ で強磁場下で平衡状態にあった系に於いて $t = 0$ で外部磁場を switch-off した場合の緩和過程をみるということである。図 (2) は、 $\alpha = -0.2$ である系に対して $\tilde{T} = 0.1 < T_1$

(但し $\tilde{T} = T/T_N$ T_N は分子場理論による転移温度で $6S^2J_1(\alpha-1)/k_B$)

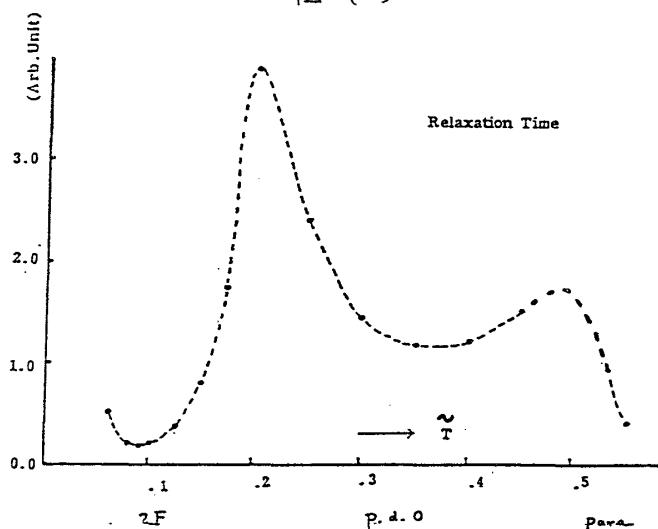
での 三つの副格子の磁化 $\langle S^{(1)} \rangle, \langle S^{(2)} \rangle, \langle S^{(3)} \rangle$ の時間発展を調べたものである。この結果から $T < T_1$ においては、三つの特性時間の存在が伺える。

図 (2)



すなわち $0 < t < t_1$ では 三組の副格子磁化は指数関数的に para 状態に落ち着くが、 $t_1 < t < t_2$ では 部分的無秩序相が安定であるかのようにみられる。しかしこれも安定ではなく $t_2 < t$ で 平衡状態 2F に移行する。

図 (3)



図(3)は 10^{-10} の精度で 三組の磁化の不安とみられる時間と平衡状態に到る緩和時間の目安としたとき、その温度依存性を表したものである。逐次相転移の臨界温度 $\tilde{T} = T_1$, $\tilde{T} = T_N$ に近づく critical slowing down の様子が明らにみられる。

References

- (1) M. Makata, J. Phys. Soc. Japan 42 (1977) 76
- (2) R. J. Glauber, J. Math. Phys. 4 (1963) 294
N. Matsudaira, Canad. J. Phys. 45 (1967) 2091
M. Suzuki and R. Kubo J. Phys. Soc. Japan 24 (1968) 51
- (3) T. Uezu and K. Kawasaki to be submitted to Prog. Theor. Phys.